

9. LAPW 法による Chromium telluride の セルフコンシステントなバンド計算

道 本 幸 一

金属、合金の電子状態のcell法による計算は、古くから Slater理論に基づいて1960年より急速に発達した。単体金属についてはめざましい結果が得られているが、合金特に磁性体の化合物のバンド構造については確たる結果は得られていない。そこで今回は比較的簡単で精度が高いLAPW法(linear-augmented-plane-wave)によりセルフコンシステントにCHROMIUM-TELLURIDE(強磁性体)に対するバンド構造計算をLSD(local-spin-density)近似の枠内で行った。その結果、狭いdバンドに重なる広いdpバンドが存在し混成軌道をつくることが重要な意味をもつことが判明した。強磁性状態ではCr原子に極在する上向きスピンと下向きスピンの個数は約3.9個と約1.3個であり、Te原子では約1.3個と約1.5個であると思われる。従って各原子のスピン履歴は $2.6\mu_B$ と $0.2\mu_B$ となり、格子間領域には約2個の電子が存在する。上向きスピンのバンドと下向きスピンのバンドは一方を他方に移動させて得られるようなものではなく、バンドの構造はスピンに依存している。特に下向きスピンのバンド構造は常磁性のそれと比較すると著しく異なっており、dバンドのエネルギーがフェルミエネルギーのかなり上に移動していることが特徴的であるという結果を得た。これらの結果は理論的に初めて得られたものであり、且つこの合金の物性を説明する基礎になるものである。